

1

1次元の問題を考えることにして、波動関数 $\psi(x)$ の x 座標の符号を変える作用素を parity と呼んで $\hat{P}$ と書くことにしよう。

$$\hat{P}\psi(x) = \psi(-x) \quad (1)$$

1. $\hat{P}^2 = I$ をしめせ。ここで I は恒等作用素である。
2. $\hat{P}$ の固有値は 1 または -1 に限られることをしめせ。
3. 力のポテンシャル $V(x)$ が偶関数であり、 $V(-x) = V(x)$ を満たせば、 $t = 0$ におい偶関数であった波動関数はその後いつまでも偶関数にとどまり、 $t = 0$ において奇関数であった波動関数はその後いつまでも奇関数にとどまることを示せ。
4. エネルギー固有関数を求めるとき、ポテンシャル $V(x)$ が偶関数ならば、parity が偶のものと奇のものにわけて求めることができるのはなぜか。

2

3次元の質点の運動エネルギー ($\frac{m}{2}v^2$) を量子力学の演算子で表したものは、Laplacian を使って $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ と表される。また角運動量の 2 乗 $\hat{L}^2$ を球座標で表したものは、

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right) \quad (2)$$

である。

ベクトル解析の結果をつかうと、これらの間には次の関係がある。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2 \quad (3)$$

ところで、水素原子はハミルトン演算子が

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad (4)$$

であらわされる量子力学系である。水素原子の基底状態のエネルギーが E であり、その波動関数がある定数 a を使って

$$\psi(r, \theta, \phi) = e^{-(r/a)} \quad (5)$$

とあらわされることを仮定して、次の間に答えよ。

1. Schroedinger 方程式から、未知数 E と a を求める連立方程式をたてよ。
2. 定数 a をもとめよ。
3. 水素原子の基底状態のエネルギー E を求めよ。

発展問題 3

次に、**2** からすすんで、水素原子の球対称でない状態をも考えることにしよう。角運動量の固有状態すなわち、球面調和関数 $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ は

$$\hat{L}^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (6)$$

$$\hat{L}_z Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \hbar m Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (7)$$

で定義される。

いま、水素原子のある定常状態のエネルギーが E であり、その波動関数がある定数 b を使って

$$\psi(r, \theta, \phi) = r^\ell e^{-(r/b)} Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (8)$$

とあらわされることを仮定して、次の問に答えよ。

1. Schrodinger 方程式から、未知数 E と b を求める連立方程式をたてよ。
2. 定数 b をもとめよ。
3. 水素原子の基底状態のエネルギー E を求めよ。

量子力学 II 中間試験正解例

解答 1

1. 任意の波動関数 $\psi(x)$ に対して

$$\hat{P}^2 \psi(x) = \hat{P} \psi(-x) = \psi(x) = I \psi(x) \quad (9)$$

これより、 $\hat{P}^2 = I$

2. ψ を固有値 λ に属する $\hat{P}$ の固有状態とすると、

$$\hat{P}^2 \psi = \lambda \hat{P} \psi = \lambda^2 \psi = \psi(x) \quad (10)$$

これより、 $\lambda^2 = 1$ したがって、 λ は 1 または -1 に限られる。

3. 運動エネルギーはいつも $\hat{P}$ と可換である。力のポテンシャル $V(x)$ も偶関数であるので、 $\hat{P}$ と可換である。したがって、ハミルトン演算子と parity 演算子は可換である。

$$[\hat{P}, \hat{H}] = 0 \quad (11)$$

時刻 t における波動関数を $\psi(t)$ と書くことにすると、

$$\hat{P} \psi(0) = \pm \psi(0) \quad (12)$$

また、一般に

$$\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \psi(0) \quad (13)$$

とかけるから、

$$\hat{P} \psi(t) = \hat{P} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \psi(0) \quad (14)$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{P} \psi(0) = \pm e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \psi(0) \quad (15)$$

$$= \pm \psi(t) \quad (16)$$

したがって t 秒後の波動関数も同じ parity をもつことになる。

4. ハミルトン演算子と parity 演算子が可換

$$[\hat{P}, \hat{H}] = 0 \quad (17)$$

であるから、ハミルトン演算子と parity 演算子は同時固有状態の完全系をもつ。これよりエネルギー固有関数を求めるとき、parity が偶のものと奇のものにわけて求めることができる。

解答 2

1. 波動関数 $\psi(r, \theta, \phi) = e^{-(r/a)}$ は回転不変すなわち角運動量 0 の固有状態なので、

$$\hat{H}e^{-(r/a)} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right) e^{-(r/a)} \quad (18)$$

$$= \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{2}{ar} + \frac{1}{a^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right\} e^{-(r/a)} \quad (19)$$

これが Schroedinger 方程式によって $Ee^{-(r/a)}$ に等しい。したがって、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{2}{ar} + \frac{1}{a^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} - E = 0 \quad (20)$$

すべての r に対してこれが成り立つことから、 $\frac{1}{r}$ の係数と 1 の係数をそれぞれ 0 とおくと、求める連立方程式がえられる。

$$\frac{\hbar^2}{ma} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 0 \quad (21)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2ma^2} - E = 0 \quad (22)$$

2. 連立方程式を a について解いて、

$$a = \frac{\hbar^2}{m} \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \quad (23)$$

3. 連立方程式を E について解いて、

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} = -\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \quad (24)$$

解答：発展問題 3

1. あたえられた波動関数 $\psi(r, \theta, \phi)$ を Schroedinger 方程式に代入して、

$$\begin{aligned} & (\hat{H} - E)r^\ell e^{-(r/b)} Y_{\ell m}(\theta, \phi) \\ = & \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} - E \right) r^\ell e^{-(r/b)} Y_{\ell m}(\theta, \phi) = 0 \end{aligned} \quad (25)$$

これから、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ -\frac{2(\ell+1)}{b} r^{\ell-1} + \frac{1}{b^2} r^\ell \right\} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} r^{\ell-1} - E r^\ell = 0 \quad (26)$$

すべての r に対してこれが成り立つことから、 $\frac{1}{r}$ の係数と 1 の係数をそれぞれ 0 とおくと、求める連立方程式がえられる。

$$\frac{\hbar^2(\ell+1)}{mb} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 0 \quad (27)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mb^2} - E = 0 \quad (28)$$

2. 連立方程式を b について解いて、

$$a = \frac{\hbar^2(\ell+1)}{m} \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \quad (29)$$

3. 連立方程式を E について解いて、

$$E = -\frac{\hbar^2}{2mb^2} = -\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{(\ell+1)^2} \quad (30)$$